Dynamical Correlation ；一つの応用

東教大理　沢　田　克　郎

Pines と Nozieres がその本（Quantum Liquid)で強調しているように多体系の Dynamical responce がわかると系の equilibium の性質がわかる (dielectric formalism)。(久保さんも同じ事を Vol7, No2 物性研究に述べておられる）Dynamical な responce を実験で求めて理論と比較するお話は２日目にお話があり，電子系，ボーズ系等での理論的な計算については３日目にお話がある筈である。

Scalar potential $\varphi(r, t)$に対する response は，このポテンシアルと系の相互作用ハミルトニアン

$$H_e = \Sigma_q \int \frac{d\omega}{2\pi} \rho_q^+ \varphi(q, \omega) e^{-i\omega t}$$

を perturbation として之で乱された系の波動函数で，物理量Bの期待値を作り，

$$\chi_{B-\rho}(q, \omega) = \frac{\langle\rho(q, \omega)\rangle}{\varphi(q, \omega)}$$

之を B−ρ−response function という。（N−P P,95−97 の定義）

具体的には

$$\chi_{\rho-\rho}(q, \omega) = \sum_n |(\rho_q^+)_{no}|^2 \frac{2\omega_{no}}{(\omega \pm i\eta)^2 - \omega^2_{no}}$$

この χ は系の dynamic form factor $S(q, \omega)$ ($S(q, \omega) = (\Sigma_n |\rho_q^+)_{no}|^2 \delta(\omega - \omega_{no})$) と

$$\chi(q, \omega) = \int_0^\infty d\omega' S(q, \omega') \left\{ \frac{1}{\omega - \omega' + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega' + i\eta} \right\}$$

でむすびついており，$S(q, \omega)$は $\varphi(q, \omega)$による系のエネルギーの dissipation/rec $\frac{dE}{dt} = F \cdot \langle J \rangle = (-)\nabla\varphi \cdot \langle J \rangle$ を求め，連続の式 $q\langle J(q, \omega)\rangle = \omega\langle\rho(q, \omega)\rangle$ によって χ を使ってかいて，これを S に直すと

$$\frac{dE}{dt} = 2\pi\omega |\varphi(q, \omega)|^2 S(q, \omega)$$

で，実験で dE/dt を求めれば $S(q,\omega)$ がわかる事になる。（Born 近似）（この様な実験については２日目にお話があると思う）$\chi_{\rho-\rho}$ がわかると，例えば系のエネルギーが求められるがこの時は，連続的に相互作用の常数についても χ がわからないとだめである。χ に附属した色々な sum rule によって，ω_{no} の n の状態がどんなものか見当を付ける事ができる。之等は例えば Pines-Nozieres の本にまかせよう。

ここでは，response fu. をみつける方法として，Laser による Raman scattering を考えてみよう。何故 Laser を使うかというと，Q.E.D でよく御存知の様に，輻射場は所謂 radiation correction を生じるので，Laser の波長の radiation correction によって，χ の中のパラメーターが勝手にかえられないか？そして χ をその“常数”についても連続的にしらべられないか？というわけであるが，そこ迄はまだ議論が行ってない。ただ，Raman scatt に χ がでてくる。（非常に低い Laser power で）ことをここでは示すのみであるが，power を上げれば当然 radiation correction が大きくなるだろう，というのであるが，どの程度かまだ当っていない。power を上げると当然 non-Lineality がきいてくるが，Laser は sharp なので，スペクトルの或るはんい（特に強いビームにかんした部分）を除いて考えるとやはりふつうの χ を使ってこの non-Linear な部分もあらわせる。

勿論，非常に複雑な問題になるが（実験の方からみるともっと複雑∵ heat up の問題がある！）考えてみてもよい様な気がする。それに，もう一つ理論的に面白いのは instability がおこって growing wave のでる事である。

以下簡単の為，laser-beam と stokes wave のみがあるとして話を進め又，光と電子ガス（プラズマ）が相互作用しているとし

$$H_{el\text{-}el} + \frac{e^2}{m}\int \psi^* \psi AA + H_{rad\ field}$$

型の相互作用のみを考えよう。（勿論電子－電子の相互作用は全部考えに入れる）更に之を

$$H_{int} = \frac{e^2}{2m\Omega} \frac{1}{\sqrt{\omega_\ell \omega_s}} (a^*_\ell a_s \rho_{\ell-s} + e.c) + H_{int}^{(-\ell,-s)} \quad \rho_{\ell-s} = \int \psi^* \psi e^{i(\ell-s)} d\Omega$$

とわける。先づ，$H_{el-el}+H_{ind}^{(\ell,-s)}+H_{rad}^{(\ell,-s)}$が exact に解けているとする。そして，$t=0$で作った packet

$$a_s^* a_\ell$$

の運動を追ってみる。但し，$t<0$ で packet$\equiv 0$という retarded boundary cond をとる。

すると，$-i\dfrac{d}{dt}a_s^*(t)a_\ell(t)=(\omega_s-\omega_\ell)\,a_s^*(t)\,a_\ell(t)$

$$+\frac{e^2}{2m\Omega}\Big\{\frac{1}{\sqrt{\omega_\ell\omega_s}}a_\ell^*(t)\rho_{\ell-s}(t)a_\ell(t)-\frac{1}{\sqrt{\omega_\ell\omega_s}}a_s^*(t)\,\rho_{\ell-s}(t)a_s(t)\Big\}-i\,\delta(t)\,a_s^*a_\ell$$

$$\approx(\omega_s-\omega_\ell)\,a_s^*(t)a_\ell(t)+\frac{e^2N_\ell}{2m\Omega}\,\frac{1}{\sqrt{\omega_\ell\omega_s}}\sum_{m,n}|m\rangle\langle n|(t)\langle m|\rho_{\ell-s}|n\rangle-i\,\delta(t)a_s^*a_\ell$$

ここで，$a_\ell^*(t)\,a_\ell(t)\sim N_\ell$ はレーザーの中にはいっている光の個数（シャープな極限の近似）又 $|n\rangle$ は $H_{el-el}+H_{int}^{(\ell,-s)}+H_{rad}^{(\ell,-s)}$ というℓ，sの光のない系の固有状態である。“密度”マトリックス $|m\rangle\langle n|(t)$の方程式は

$$-i\,\frac{d}{dt}|m\rangle\langle n|(t)=(E_m-E_n)\;|m\rangle\langle n|(t)$$

$$+\frac{e^2}{2m}\;\frac{1}{\sqrt{\omega_\ell\omega_s}}\Big[\,(a_\ell^*a_s\rho_{\ell-s}+a_s^*a_\ell\rho_{s-\ell})\;|m\rangle\langle n|\;-$$

$$-|m\rangle\langle n|\;(a_\ell^*a_s\rho_{\ell-s}+a_s^*a_\ell\rho_{s-\ell})\Big](t)-i\,\delta(t)|m\rangle\langle n|$$

で，ここで“一般化された”R.P.A を行う。これは

$$F\;|W\;F|m\rangle\langle n|\;=\;|n\rangle\langle n|\cdot\langle n|F|m\rangle$$

$$+\sum_{p(\neq n)}|p\rangle\langle n|\cdot\langle p|F|m\rangle$$

の時に，$F|m\rangle\langle n|\doteqdot|n\rangle\langle n|\cdot\langle n|F|m\rangle$　ととる。

又　$|m\rangle\langle n|F\doteqdot|m\rangle\langle m|\cdot\langle n|F|m\rangle$　のみをのこし，phase のそろわない“密度”マトリックス $|p\rangle\langle n|$ 等をおとす。

すると，この近似では

$$-i\frac{d}{dt}|n\rangle\langle n|(t)=-i\,\delta(t)|n\rangle\langle n|$$

Dynamical Correlation

となり $|n\rangle\langle n|(t)$ は (step fu. $x|n\rangle\langle n|$)になる。フーリエ変換して,

$$a^*_\ell(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t}\, a^*_\ell(\omega)\,d\omega$$

等とすると，この近似で

$$\omega|m\rangle\langle n|(\omega) = (E_m - E_n)\,|m\rangle\langle n|(\omega)$$
$$+\ (|n\rangle\langle n| - |m\rangle\langle m|)\frac{e^2}{2m\Omega}\frac{1}{\sqrt{\omega_\ell\omega_s}}(\{a^*_\ell a_s\}(\omega)\,\langle n|\rho_{\ell-s}|m\rangle + \{a^*_s a_\ell\}(\omega)$$
$$\langle n|\rho_{s-\ell}|m\rangle) + |m\rangle\langle n|$$

がでて一方 $\{a^*_s a_\ell\}(\omega)$ は $a^*_s a_\ell(t)$ をフーリエ変換して.

$$(\omega - (\omega_s - \omega_\ell))\{a^*_s a_\ell\}(\omega) = \frac{e^2 N_\ell}{2m\Omega\sqrt{\omega_\ell\omega_s}}\sum_{mn}|m\rangle\langle n|(\omega)\langle m|\rho_{\ell-s}|n\rangle + a^*_s a_\ell$$
$$(\omega - (\omega_\ell - \omega_s))\{a^*_\ell a_s\}(\omega) = -\frac{e^2 N_\ell}{2m\Omega\sqrt{\omega_\ell\omega_s}}\sum_{mn}|m\rangle\langle n|(\omega)\langle m|\rho_{s-\ell}|n\rangle + a^*_\ell a_s$$

がでる。そこで $|m\rangle\langle n|(\omega)$ を代入すると,

$$(\omega - (\omega_s - \omega_\ell) - \left(\frac{e^2}{2m}\right)^2 \frac{N_\ell}{\Omega\,\omega_\ell\omega_s}\ \frac{1}{\Omega}\sum_{mn}\frac{(|n\rangle\langle n| - |m\rangle\langle m|)\,|\langle m|\rho_{\ell-s}|n\rangle|^2}{\omega - i\delta - (E_m - E_n)})$$

$$\{a^*_s a_\ell\}(\omega) = \frac{e^2 N_\ell}{2m\Omega\sqrt{\omega_\ell\omega_s}}\sum_{mn}\frac{|m\rangle\langle n|\langle m|\rho_{\ell-s}|n\rangle}{\omega - i\delta - (E_m - E_n)} + a^*_s a_\ell$$

が得られる。簡単にするために，$\langle 0| \rightarrow \leftarrow |0\rangle$ をとると

$$\langle 0|\frac{1}{\Omega}\sum_{mn}\frac{(|n\rangle\langle n| - |m\rangle\langle m|)\,|\langle m|\rho_{\ell-s}|n\rangle|^2}{\omega - i\delta - (E_m - E_n)}|0\rangle$$

$$= \frac{1}{\Omega}\sum_n\left(\frac{|\langle n|\rho_{\ell-s}|0\rangle|^2}{\omega - i\delta - \omega_{no}} - \frac{|\langle n|\rho^*_{\ell-s}|0\rangle|^2}{\omega - i\delta + \omega_{no}}\right)$$
$$= \chi^*(\omega, \ell - s)$$

という response function になる。但し注意すべきは $|\ \rangle$ のじようたいは ℓ, s という光は全然はいっていないので，全系の波動函数ではない。しかし一寸考えるとわかる様に，ℓ，s という光が特別の役をするわけでないので，ほんとうの（ $|\ \rangle$ の中には "radiation" correction もはいっている） χ^* とこの χ^* の差は 0 $\left(\frac{1}{\Omega}\right)$ である。故に以下 χ はほんとうの (rad. correction も入れた) ものと見て差支えない。

$$\{a_s^* a_\ell\}(\omega) = \frac{a_s^* a_\ell}{(\omega - (\omega_s - \omega_\ell) - (\frac{e^2}{2m})^2 \frac{N_\ell}{\Omega \omega_\ell \omega_s} \chi^*(\omega, \ell - s)}$$

（但しすべての量は$<0||0>$をとったとりようかいする。）この様にして，tが十分たったあとのpacket のスペクトルはχ^*が直接にきいてくる。

neglect した項はすべてn_s, n_e を含むので（一般化されたRPA に対する補正も$||p><n|$ の式にa_s^*, a_ℓ^*等がでる）実は展開は(N_ℓ/Ω)についてのもので，N_ℓ/Ω が大きければχ^*の中にも当然このcorrection がでるだろう。

ついでにこの式からinstability は直ちにでてくる。stokes の波はlaser よりωが小さいので，$\omega_s - \omega_\ell < 0$ である。

今，$e^2 \ll$として，weak-coupling limit をとってみると，

$$\mathrm{Real}\ \omega \sim \omega_s - \omega_\ell <$$

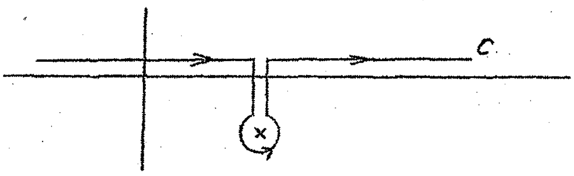
又

$$\mathrm{Im}\ \omega \sim (\frac{e^2}{2m})^2 \frac{Ne}{\Omega \omega_\ell \omega_s} \mathrm{Im} \chi^*(\omega_s - \omega_\ell, \ell - s)$$

$\omega_s - \omega_\ell < 0$ 故 χ の 2項目よりImpart がでて$\mathrm{Im}\chi^* < 0$

$\therefore$ $\mathrm{Im}\ \omega < 0$ 　　である。

$a_\ell(t)$ は$t<0$で0ととった故，ふつうの解は（decay するもの）$\mathrm{Im}\ \omega > 0$ である筈であるが，之は$\mathrm{Im}\ \omega < 0$ にでたので$a_\ell^*(t) = 0, t<0$ に合う様に積分路をかえて$\int_{-\infty}^{\infty} \rightarrow \oint_c$



ととると，この波はGrow する事がわかる。（勿論，Grow しだすとN_ℓ/Ωが小さくなくなり，ここの近似はわるくなりhigher-order を計算しなければならない）（同じ結論が，ふつうのR.P.A の範囲内で光をsemi-classical にあつかって，Bloembergen とShen によって得られている。P.R.141 298 (66) 以上の議論のもっと詳しい事及び関聯した事についてはProg.T.P.37 No6 に出る筈であるのでこの位にしておくが，ともかく，Laser によるχのdirect なcheck というのは理論，実験共に面白い事ではないだろうか?!